「s-d 相互作用で共鳴点が2つある」ということ

倉田 泰 幸（北大理）

（3月23日受理）

最近、Takano[1] らは、稀薄合金でのs−d 相互作用による共鳴散乱が、exchange coupling J の正負に応じてそれぞれ不純物スピンの大きさに依存する共鳴点を持つて起ることを主張している。これは今までのantiferro−coupling の時にのみ共鳴散乱があるとする結果[2]と異なる。

ここで、Takano らと同じ結果が、以下に述べる極く簡単化された（明かにunphysicalな）モデルから得られることを示し、さらに、いわゆるs−d の問題では発散項を全部集めなければcriticalに違つた結果を導く例を与える。

モデルとして、絶対零度でフエルミ面まで つまれている電子ガスは堅く凍結していて、不純物スピンによるs−d 相互作用をうけて励起することはないと仮定し、フエルミ面上の自由電子1ケの不純物スピンによる散乱を考える。これは、フエルミ面内の（より精確には、不純物スピンのまわりに誘起された）電子との交換散乱が無視されていると云う意味でrealistic でない。

$$H = H_0 + H_1$$

$$H_0 = \sum_{\alpha=\uparrow\downarrow} \sum_{\lambda}{}' \omega_\lambda a^+_{\lambda\alpha} a_{\lambda\alpha}$$

$$H_1 = \frac{J}{2N} \sum_{\lambda\mu}{}' \{ S^- a^+_{\lambda\uparrow} a_{\mu\downarrow} + S^+ a^+_{\lambda\downarrow} a_{\mu\uparrow} + S^Z (a^+_{\lambda\uparrow} a_{\mu\downarrow}) \} \qquad (1)$$

ここで和Σ'はフエルミ面より上について走る。

（1） は、相互作用前の不純物スピンSの1つの成分をMとすると、$M+\frac{1}{2}$を運動の恒量とし、次の2チヤネルの散乱過程を与えることがわかる。

$$
\begin{array}{ccc}
M+\uparrow & \longrightarrow & M+\uparrow \\
 & \times & \\
(M+1)+\downarrow & \longrightarrow & (M+1)+\downarrow
\end{array}
\qquad (2)
$$

$M+\alpha(\omega)$　　$M'+\beta(\omega)$ に対応する t－行列要素を $T^{M'\,M}_{\beta\ \alpha}(\omega)$ と、free state を $|M\alpha(\omega)>$ と書くと[3)]

$$
T^{M'M'}_{\alpha\ \beta}(\omega)=\langle M\alpha(\omega)\,|H_1|M'\ \beta(\omega)\rangle
$$

$$
+\langle M\alpha(\omega)\,|H_1\frac{1}{\omega^{+}-H}H_1|M'\ \beta(\omega)\rangle \qquad (3)
$$

ただし、$|M\alpha(\omega)\rangle=|M\rangle|\alpha(\omega)\rangle_0$　　ここで $|\alpha(\omega)\rangle$ はエネルギー ω，スピン α の自由電子の状態、$|M\rangle$ は、不純物スピンとフエルミ面まで堅く凍結した電子ガスの状態を示す。

（3）から過程（2）に対応する次の4つの t－行列要素を計算する。

$$
T=\begin{pmatrix}
T^{M\ M}_{\uparrow\ \uparrow}(\omega) & T^{M+1\ \ M}_{\downarrow\ \ \ \uparrow}(\omega) \\
T^{M\ \ M+1}_{\uparrow\ \ \ \downarrow}(\omega) & T^{M+1\ M+1}_{\downarrow\ \ \ \ \downarrow}(\omega)
\end{pmatrix} \qquad (4)
$$

（1）の時間反転に対する不変性から、これは対称行列である。以下、上の添字Mを省略する。

我々のモデルについての仮定から

$$
H_1|M\uparrow(\lambda)\rangle=\frac{J}{2N}\sum_{\lambda}\{\sqrt{(S-M)(S+M+1)}\,|(M+1)\downarrow(\lambda)\rangle
$$

$$
+M|M\uparrow(\lambda)\rangle\}
$$

$$
H_1(M+1)\downarrow(\lambda)\rangle=\frac{J}{2N}\sum_{\lambda}\{\sqrt{(S-M)(S+M+1)}\,|M\uparrow(\lambda)\rangle
$$

$$
-(M+1)|(M+1)\downarrow(\lambda)\rangle\} \qquad (5)
$$

と簡単に表わされることに注意すると、4つの行列要素は、

$$T_{\uparrow\uparrow}(\omega) = \frac{J}{2N}M + \left(\frac{J}{2N}\right)^2 \sum_{\lambda\mu} \{ M^2 G_{\uparrow\uparrow}(\lambda,\mu) + (S-M)(S+M+1) G_{\downarrow\downarrow}(\lambda,\mu) + M\sqrt{(S-M)(S+M+1)} \left[G_{\uparrow\downarrow}(\lambda,\mu) + G_{\downarrow\uparrow}(\lambda,\mu) \right]$$

$$T_{\downarrow\downarrow}(\omega) = -\frac{J}{2N}(M+1) + \left(\frac{J}{2N}(M+1)\right) + \left(\frac{J}{2N}\right)^2 \sum_{\lambda\mu} \{ (S-M)(S+M+1) G_{\uparrow\uparrow}(\lambda,\mu) + M+1)^2 G_{\downarrow\downarrow}(\lambda,\mu) - (S-M)(S+M+1)\left(G_{\uparrow\downarrow}(\lambda,\mu) + G_{\downarrow\uparrow}(\lambda,\mu)\right) \}$$

$$T_{\uparrow\downarrow}(\omega) = \frac{J}{2N}\sqrt{(S-M)(S+M+1)} + \left(\frac{J}{2N}\right)^2 \sum_{\lambda\mu} \{ M\sqrt{(S-M)(S+M+1)}\, G_{\uparrow\uparrow}(\lambda,\mu) - (M+1)\sqrt{(S-M)(S+M+1)}\, G_{\downarrow\downarrow}(\lambda,\mu) - M(M+1)\, G_{\uparrow\downarrow}(\lambda,\mu) + (S-M)(S+M+1)\, G_{\downarrow\uparrow}(\lambda,\mu) \}$$

$$T_{\downarrow\uparrow}(\omega) = \frac{J}{2N}\sqrt{(S-M)(S+M+1)} + \left(\frac{J}{2N}\right)^2 \sum_{\lambda\mu} \{ M\sqrt{(S-M)(S+M+1)}\, G_{\uparrow\uparrow}(\lambda,\mu) - (M+1)\sqrt{(S-M)(S+M+1)}\, G_{\downarrow\downarrow}(\lambda,\mu) + (S-M)(S+M+1)\, G_{\uparrow\downarrow}(\lambda,\mu) - M(M+1)\, G_{\downarrow\uparrow}(\lambda,\mu) \} \tag{6}$$

ここで、

$$G_{\alpha\beta}(\lambda,\mu) = \left\langle M\alpha(\lambda) \left| \frac{1}{\omega^+ - H} \right| M'\beta(\mu) \right\rangle \tag{7}$$

これは、

$$\frac{1}{\omega^+ - H} = \frac{1}{\omega^+ - H_0} + \frac{1}{\omega^+ - H_0} H_1 \frac{1}{\omega^+ - H}$$

を用いて求められる：

$$G^{MM'}_{\alpha\beta}(\lambda,\mu)=\frac{1}{\omega^{+}-\omega_\lambda}\,\delta_{\alpha\beta}\delta_{\lambda\mu}+\frac{1}{\omega^{+}-\omega_\lambda}\,\frac{J}{2N}\sum_{M''}\sum_{\gamma}\sum_{\nu}\langle M\,|\,Q_{\alpha\gamma}\,|\,M''\rangle$$
$$\times G^{M''M'}_{\gamma\beta}(\nu,\mu) \tag{8}$$

ただし、$Q_{\uparrow\uparrow}=S^{Z}$, $Q_{\downarrow\downarrow}=-S^{Z}$, $Q_{\uparrow\downarrow}=S^{-}$, $Q_{\downarrow\uparrow}=S^{-}$, $Q_{\downarrow\uparrow}=S^{+}$
である。

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\mu)\equiv\sum_{\nu}G_{\alpha\beta}(\nu,\mu)\qquad I(\omega)\equiv\sum_{\lambda}\frac{1}{\omega^{+}-\omega_\lambda}$$

と書くと（8）から$\mathcal{G}_{\alpha\beta}$を求める4ケの連立方程式をうる。

$$\begin{cases}\left[1-\dfrac{J}{2N}M\,I(\omega)\right]\mathcal{G}_{\uparrow\uparrow}(\mu)-\dfrac{J}{2N}\sqrt{(S-M)(S+M+1)}\,I(\omega)\,\mathcal{G}_{\downarrow\uparrow}(\mu) \\ \qquad\qquad\qquad\qquad =\dfrac{1}{\omega^{+}-\omega_\mu} \\ -\dfrac{J}{2N}\sqrt{(S-M)(S+M+1)}\,I(\omega)\,\mathcal{G}_{\uparrow\uparrow}(u)+\left[1+\dfrac{J}{2N}(M+1)\,I(\omega)\right]\mathcal{G}_{\downarrow\uparrow}(\mu) \\ \qquad\qquad\qquad\qquad =0\end{cases}$$

$$\begin{cases}\left[1+\dfrac{J}{2N}(M+1)\,I(\omega)\right]\mathcal{G}_{\downarrow\downarrow}(\mu)-\dfrac{J}{2N}\sqrt{(S-M)(S+M+1)}\,I(\omega)\,\mathcal{G}_{\uparrow\downarrow}(\mu) \\ \qquad\qquad\qquad\qquad =\dfrac{1}{\omega^{+}-\omega_\mu} \\ -\dfrac{J}{2N}\sqrt{(S-M)(S+M+1)}\,\mathcal{G}_{\downarrow\downarrow}(\omega)+\left[1-\dfrac{J}{2N}M\,I(\omega)\right]\mathcal{G}_{\uparrow\downarrow}(\mu)=0\end{cases} \tag{9}$$

これから求めた$\mathcal{G}_{\alpha\beta}$ を（6） を代入して、結局$T_{\alpha\beta}(\omega)$ についての次の表式をうる。

$$\begin{cases}T_{\uparrow\uparrow}(\omega)=\dfrac{J}{2N}\,\dfrac{M+\dfrac{J}{2N}S(S+1)\,I(\omega)}{\left(1+\dfrac{J}{2N}(S+1)\,I(\omega)\right)\left(1-\dfrac{J}{2N}S\,I(\omega)\right)} \\ T_{\downarrow\downarrow}(\omega)=\dfrac{J}{2N}\,\dfrac{-(M+1)+\dfrac{J}{2N}S(S+1)\,I(\omega)}{\left(1+\dfrac{J}{2N}(S+1)\,I(\omega)\right)\left(1-\dfrac{J}{2N}S\,I(\omega)\right)}\end{cases}$$

$$
\left\{
\begin{aligned}
T_{\uparrow\downarrow}(\omega) &= T_{\downarrow\uparrow}(\omega) \\
&= \frac{J}{2N}\frac{\sqrt{(S-M)(S+M+1)}}{\left(1+\frac{J}{2N}(S+1)\,T(\omega)\right)\left(1-\frac{J}{2N}S\,I(\omega)\right)}
\end{aligned}
\right.
$$

この様にして、最初の出発点でモデルについてなした仮定以外、まつたく近似なしに、t－行列要素をうることができる。

$I(\omega)$ を評価する。積分に直し、状態密度をフェルミ面での値 ρ で置きかえ、

$$I(\omega)=-\rho\int_0^{\infty}d\xi\,\frac{1}{\xi-\omega-io}$$

$$=\ell m\frac{\omega}{\varepsilon_f}-i\pi\rho\,\theta(\omega)$$

(10)から

$J>0$ (antiferro-coupling)の時

$$\omega_0=\varepsilon_f\exp\left[-\frac{N}{J_\rho(S+1)}\right] \tag{11}$$

$J<0$ (ferro-coupling)の時

$$\omega_1=\varepsilon_f\exp\left[\frac{N}{J_\rho S}\right] \tag{12}$$

で、それぞれ共鳴散乱が起ることがわかる。

このようにして、我々のモデルは、Takano らの同様の結果を与える。

さらに、(10)の分母

$$\left(1+\frac{J}{2N}(S+1)\,I(\omega)\right)\left(1-\frac{J}{2N}SI(\omega)\right)=1+\frac{J}{2N}I(\omega)-\left(\frac{J}{2N}\right)^2S(S+1)\,I^2(\omega)$$

で、$\left(\frac{J}{2N}\right)^2$ の項を truncate すると、$J<0$ でのみ共鳴するという（しかもスピンの長さに依存しない共鳴点を与えるという）結果を得る，いまの問題では、$(J/2N)\rho\ln\frac{\omega}{\varepsilon_f}\sim1$ の寄与を与えうる，無限に続く singular な摂動項を集めることが要求されるから、上のような truncation が異る結果を与

える。この可能性については、Nagaoka[4)]が彼自身の取扱い[2)] について注意している通りである。

次に、変換行列Uを用いて、$|S+\frac{1}{2}, M+\frac{1}{2}>$, $|S-\frac{1}{2}, M+\frac{1}{2}>$ をbase とする表示へ移る。

$$\begin{pmatrix} |S+\frac{1}{2}, M+\frac{1}{2}> \\ \\ |S-\frac{1}{2}, M+\frac{1}{2}> \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2S+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{S+M+1} & \sqrt{S+M} \\ \\ -\sqrt{S-M} & \sqrt{S+M+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |M\uparrow> \\ \\ |(M+1)\downarrow> \end{pmatrix} \tag{13}$$

そのとき、Tは次のように変換される。

$$T_d(\omega) = \begin{pmatrix} T_d^t(\omega) & 0 \\ 0 & T_d^s(\omega) \end{pmatrix} = UTU^{-1} \tag{14}$$

ここで

$$T_d^t(\omega) = \frac{J}{2N} \frac{S}{1-\frac{J}{2N}SI(\omega)}$$

$$T_d^s(\omega) = -\frac{J}{2N} \frac{S+1}{1+\frac{J}{2N}(S+1)I(\omega)} \tag{15}$$

また、対角化したS－行列要素 $S_d^t(\omega)$, $S_d^s(\omega)$ は Jost 函数による表現になる。J＞0では、$T_d^s(\omega)$ が ω_0 で、J＜0では $T_d^t(\omega)$ が ω_1 で、それぞれ共鳴することがわかる。共鳴点付近でのBreit-Wigner 式は、たとえば $\omega \simeq \omega_0$ では

$$T_d^s(\omega) \simeq -\frac{1}{\pi\rho} \frac{\pi\omega_0}{\omega-\omega_0-i\pi\omega_0}$$

である。

上のことから理解されるように、不純物スピンと $(S+\frac{1}{2})$ 波、$(S-\frac{1}{2})$ 波をつくる電子の波束を作つてやれば、上のようなeigen-channelの散乱問題と

して、対角化された表現をうる。このとき、eigen phase shift の sum rule として、induced electron spin polarization を求めることは興味のある問題である。

我々の、モデルとしては明らかな仮定と、その限りでは精確な答から、正しい答として次のような予想ができる。

1）ここで全部落されている exchang scatteringの過程を全部拾い集めるとスピンの長さに依らない結果を得る。[5] もう１つの別の（少い）可能性として

2）Suhl，Nagaoka，Abrikosov は上に述べたような systematic truncation をやつているのかもしれない。別に、完全性の証明があるわけではないから、この場合も排除されない。

最後に、松原、長谷川先生、朝日、牟田されに感謝します。それぞれの方から、親切な guidanceと有益な示唆をいただきました。

文　　献

1) 高野、小川、大沢、高中　　物性研究 5 No.1 (1965)

2) J. Kondo　P. T. P. 32, 37 (1964)

H. Suhl　P. R. 138, A515 (1965)

Y. Nagaoka　P. R. 138, A1112 (1965)

A. Abrikosov　Physics 2, 5 (1965)

3) B. A. Lippmann and J. Schwinger　P. R. 79, 469 (1950)

4) 長岡洋介　　物性研究、前号

5) たとえば、摂動計算では、各次数で direct scattering と対応する exchange scattering とからの寄与の合計からスピンの長さは消える。